

УДК 538.911

В. Н. Липунов¹, А. В. Маркидонов^{2*}

¹ Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,
г. Барнаул

² Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного
университета, г. Новокузнецк

**markidonov_artem@mail.ru*

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ СВОБОДНОГО ОБЪЕМА В ГЦК-КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния внешнего воздействия на процесс структурных изменений, происходящих в обедненной зоне кристалла с ГЦК-решеткой. Исследование моделируемой структуры показало, что избыточный свободный объем растворяется в межзеренных границах. После генерации ударных волн доля растворенного свободного объема снижается, и он локализуется в области генерирования в виде нанопор.

Ключевые слова: кристалл, вакансия, кластер, волна, моделирование

V. N. Lipunov, A. V. Markidonov

RESEARCH BY THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS OF REDISTRIBUTION OF FREE VOLUME IN THE FCC CRYSTAL WITH EXTERNAL INFLUENCE

The molecular dynamics method is used to study the effect of external influences on the process of structural changes occurring in the depletion zone of a crystal with an fcc lattice. The study of the simulated structure showed that the excess free volume dissolves in the grain boundaries. After the generation of shock waves, the fraction of the dissolved free volume decreases, and it is localized in the generation region in the form of nanopores.

Key words: crystal, vacancy, cluster, wave, modeling

Область повреждения твердого тела, образуемая в результате прохождения каскада атомных соударений при радиационном воздействии, имеет неравномерное распределение атомов. При этом центр данной области представляет собой обедненную зону, окруженную множеством атомов, смещенных из равновесных положений. Последующая эволюция обедненной зоны в процессе структурной релаксации успешно исследуется методами компьютерного моделирования, чему посвящены серии различных работ. В большинстве работ не учитывается факт генерации в кристалле ударных волн, возникающих из-за несоответствия времени термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и времени отвода от нее тепла [1]. Резкое расширение перегретой области порождает ударную волну. Как показали наши прошлые исследования, данные волны могут оказывать значительное влияние на процессы образования, кластеризации и миграции дефектов [2–8]. В работе приведены результаты исследования структурных изменений, происходящих в ГЦК-кристалле, содержащем высокую концентрацию вакансий, при генерации в нем ударных волн.

Исследование проводилось с помощью метода молекулярной динамики, в котором рассматривается система взаимодействующих частиц и их движение описывается классическими дифференциальными уравнениями Ньютона. Для интегрирования уравнений использовался скоростной метод Верле с шагом 5 фс. Межчастичное взаимодействие при моделировании описывалось с помощью потенциала, рассчитанного с помощью метода погруженного атома. Для визуализации структуры применялась программа [9].

Проведенное исследование показало, что при 15 %-ой концентрации вакансий наблюдается локальная аморфизация в объеме моделируемого кристалла. При более значительном разогреве с последующей закалкой путем сведения скоростей атомов к нулю наличие избыточного свободного объема способствует образованию зеренной структуры (рис., а). Дальнейшее увеличение создаваемых вакансий приводит к образованию пор в кристалле. Под воздействием волн наблюдается укрупнение зерен и при этом распределенный свободный объем начинает локализоваться в области генерации волн (рис., б).

Расчеты показали, что, например, после прохождения по расчетной ячейке, содержащей 15 %-ую концентрацию вакансий, пяти ударных волн, генерируемых с интервалом 3000 вычислительных шагов, при

температуре 600 К, 900 К и 1200 К содержание растворенного свободного объема уменьшается на 3,74 %, 4,69 % и 6,73 % соответственно.

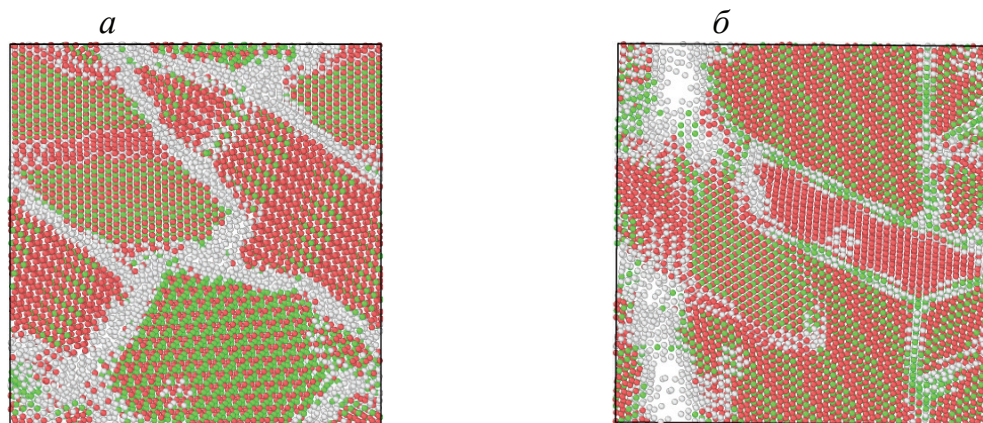


Рис. 1. Структура моделируемого кристалла ($n = 15\%$, $T = 1200\text{ К}$) после релаксации:

a — без генерации ударных волн; *б* — после прохождения пяти ударных волн

Таким образом, прохождение ударных волн по сформированной в обедненной зоне поликристаллической структуре способствует уменьшению доли растворенного на межзеренных границах свободного объема, в том числе путем его локализации в виде пор.

Литература

1. Овчинников В. В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук. 2008. Т. 178, № 9. С. 991–1001.
2. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Обидина О. В. Агрегатизация вакансий, инициированная послекаскадными ударными волнами // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9, № 4. С. 548–555.
3. Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн / А. В. Маркидонов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10, № 4. С. 563–571.
4. Роль ударных послекаскадных волн в низкотемпературной активации самодиффузии / А. В. Маркидонов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11, № 3. С. 346–352.

5. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Смирнова М. В. Процесс самодиффузии в ГЦК-кристалле, вызванный прохождением ударной волны // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58, № 6. С. 80–84.

6. Порообразование в ГЦК-кристалле под воздействием ударных послекасадных волн / А. В. Маркидонов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12, № 2. С. 231–240.

7. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Полетаев Г. М. Трансформация нанопор в золоте в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // Известия РАН. Серия физическая. 2015. Т. 79, № 9. С. 1233–1237.

8. Атомные механизмы миграции границы зерен кручения (110) под воздействием ударных послекасадных волн на примере никеля/А. В. Маркидонов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. Т. 14, № 4. С. 528–534.

9. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVI-TO — the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. Vol. 18. 015012 (7 pp).